

# Первопринципные расчеты магнитных свойств мультислойной системы $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x/\text{Cu}(100)$

**Поворознюк Евгений Сергеевич**

*Омский государственный университет*

*Мамонова Марина Владимировна, к.ф.-м.н.*

*[proaspovoroz@icloud.com](mailto:proaspovoroz@icloud.com)*

В настоящее время не все результаты возможно получить в экспериментальных условиях. Но благодаря колоссальным успехам, достигнутым в развитии современной вычислительной техники и методах решения больших систем уравнений, при расчете свойств веществ из первых принципов (ab initio) доступно получение точности, сопоставимой с получаемой в эксперименте.

Целью данного исследования является расчет полной энергии системы  $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x/\text{Cu}$  и магнитных моментов атомов сплава для различных спиновых конфигураций. В работе использовался программный комплекс VASP [1,2], основанный на методе функционала плотности, с применением приближения PAW-GGA-PBE. Данный программный комплекс служит для проведения первопринципных расчетов, используя квантово-механические методы и методы молекулярной динамики.

Система (рис.1) моделировалась с помощью периодической 32-атомной суперячейки ( $2 \times 2$ ), состоящей из трех атомарных слоев меди и трех атомарных слоев сплава  $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x$  с обеих сторон пластины с ориентацией поверхностной грани (100). Постоянная решетки  $a_{\text{cell}} = 3,61 \text{ \AA}$  соответствовала постоянной решетки меди. Толщина вакуумного слоя равная  $3 \text{ \AA}$  выбиралась таким образом, чтобы две поверхности, образованные пластиной, не взаимодействовали друг с другом из-за периодических граничных условий. Расчеты электронной структуры осуществлялись интегрированием в зоне Бриллюэна с использованием k-сетки, построенной по методу Монкхорста-Пака. Размерность k-сетки была выбрана  $8 \times 8 \times 1$  при энергии обрезания базиса плоских волн равной  $350 \text{ эВ}$ .

Исследовался случай коллинеарного магнетизма спины атомов ориентированы в одно направлении перпендикулярном поверхности. Было рассмотрено три спиновых конфигурации атомов пленок сплава: одно ферромагнитное (все спины направлены вверх) и два антиферромагнитных состояния  $(+-+--+-+--)$  и  $(++----++++--)$ . Знаком '+' обозначено направление проекции спина - вверх, знаком '-' направление вниз. Рассчитанные значения полных энергий систем для трех конфигураций и магнитных моментов  $\mu_i$  атома сплава в i-м слое и  $\mu_{\text{tot}}$  средний магнитный момент атома приведены в таблице.

Кон цен тра ция	$E^{\text{FM}}$ , ЭВ	$E_1^{\text{AFM}}$ , ЭВ	$E_2^{\text{AFM}}$ , ЭВ	$\mu_1$ , $\mu_B/\text{ат}$ Co	$\mu_1$ , $\mu_B/\text{ат}$ Ni	$\mu_2$ , $\mu_B/\text{ат}$ Co	$\mu_2$ , $\mu_B/\text{ат}$ Ni	$\mu_3$ , $\mu_B/\text{ат}$ Co	$\mu_3$ , $\mu_B/\text{ат}$ Ni	$\mu_{\text{tot}}$ , $\mu_B/\text{ат}$
X = 0	-201,463	- 197,313	- 197,313	1,602	-	1,580	-	1,825	-	1,670
X = 0,5	-185,253	- 181,515	- 195,304	1,675	0,655	1,659	0,467	1,877	0,695	1,173

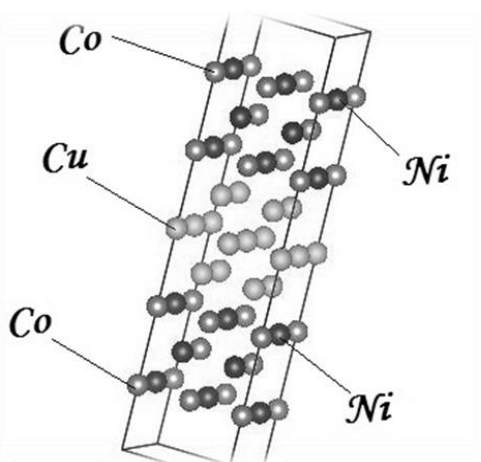


рис.1. Структура исследуемой системы

Сравнение значений магнитных моментов атомов в разных слоях позволяет сделать вывод, что наибольшим моментом обладают атомы наиболее удаленные от подложки. Магнитный момент атома кобальта в сплаве больше магнитного момента атома в пленке чистого кобальта. Также полная энергии системы  $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x/\text{Cu}$  при  $x = 0,5$  больше, чем при  $x=0$ . Полученные значения могут быть использованы для определения параметров обменного взаимодействия и коэффициента магнитосопротивления для мультислойных структур с эффектами гигантского магнитосопротивления [3].

Список публикаций:

[1] G.Marsman, M.Kresse. VASP the GUIDE. Wien: Universitat Wien. 2000. P.208.

[2] G. Kresse, D. Joubert, From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method// Phys. Rev. B 59.1999. p. 1758.

[3] В.В. Прудников, П.В. Прудников, Д.Е. Романовский, Моделирование методами Монте-Карло мультислойных магнитных структур и расчет коэффициента магнитосопротивления // Письма в ЖЭТФ, Т.102, 10, с. 759-765

## Теоретическое исследование HR-XANES спектров M4-края урана

Подковырина Юлия Сергеевна

Пидченко Иван Николаевич, Витова Тоня, Солдатов Александр Владимирович

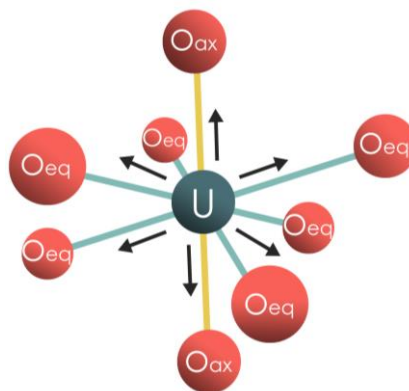
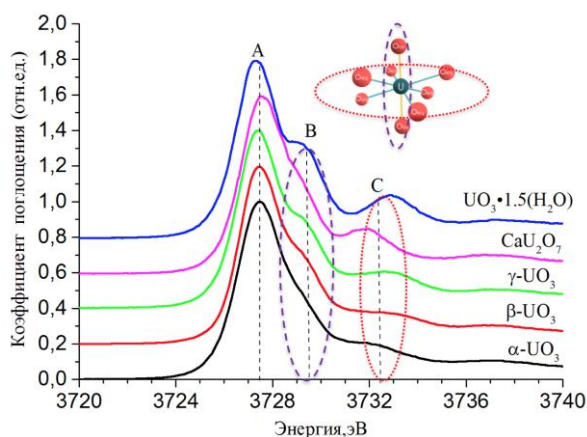
Южный федеральный университет

МИЦ «Интеллектуальные материалы»

[yuliya.podkovyrina@bk.ru](mailto:yuliya.podkovyrina@bk.ru)

В настоящей работе были проведены теоретические расчеты HR-XANES спектров M4-края U в  $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ -фазах триоксида урана  $\text{UO}_3$ . Ранее в работах было показано [1], что спектроскопии рентгеновского поглощения с высоким энергетическим разрешением (HR-XANES) M4-края U ( $3d_{3/2} \rightarrow 5f$ ) может успешно применяться для изучения электронной и атомной структуры ураносодержащих материалов за счет снижения экспериментального уширения. Объекты исследования были выбраны с целью отработки методики установления уранильного или уранатного типа связи U-O. Настоящей задачей данного исследования было выявить и установить изменения длины связи между атомом U и двумя аксиальными атомами O при уранильном типе связи. В таком случае U(IV) образует две короткие ( $<1.8 \text{ \AA}$ ) ковалентные аксиальные связи с двумя атомами кислорода ( $\text{U-O}_{\text{ax}}$ ). Экспериментальные измерения (рис. 1а) M4-края U для исследуемых образцов  $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ - $\text{UO}_3$ , а также для референтных соединений  $\text{UO}_3 \cdot 1.5(\text{H}_2\text{O})$  (меташопит) и  $\text{Ca}_2\text{U}_2\text{O}_7$  (кальций уранат) были осуществлены на источнике синхротронного излучения ANKA (г.Карлсруэ, Германия) [2,3] с помощью 5-ти кристалльного эмиссионного спектрометра станции INE.

Было проведено *ab-initio* теоретическое моделирование спектров M4-края поглощения для всех вышеуказанных соединений в рамках теории полного многократного рассеяния. Также были рассчитаны спектры для моделей описывающие следующие случаи: а) сжатие/растяжение  $\text{U-O}_{\text{ax}}$ , б) сжатие/растяжение  $\text{U-O}_{\text{eq}}$  в) сжатие/растяжение и  $\text{U-O}_{\text{ax}}$  и  $\text{U-O}_{\text{eq}}$  (рис 1.б).



а)

б)

рис. 1 а) Экспериментальные HR-XANES спектры M4-края U, б) теоретические модели для изучения влияния варьирования длин  $\text{U-O}_{\text{ax}}$  и  $\text{U-O}_{\text{eq}}$

Все спектры HR-XANES имеют по три особенности в области A ( $\sim 3727 \text{ эВ}$ ), B ( $\sim 3729 \text{ эВ}$ ) and C ( $\sim 3732 \text{ эВ}$ ), как изображено на рисунке 1а, которые соответствуют электронным переходам с  $3d_{3/2}$  на  $5f_5/5f_6$ ,  $5f_7$  и  $5f_8$  незаполненные валентные орбитали U(VI) в уранил-ионе  $\text{UO}_2^{2+}$  [6]. Гибридизированные  $5f$  и  $6p$  орбитали U